基于 C5G7-MOX 的中子输运计算方法比较及 MOC 参数敏感性初步分析

龚瀚源[1]　张彬航[2,3*]　张永红[3]　唐海波[3]　袁显宝[3]

1(三峡大学 机械与动力学院,湖北　宜昌 443002)

2(先进核能技术设计与安全教育部重点实验室,湖南　衡阳 421200)

3(三峡大学 理学院,湖北　宜昌 443002)

摘要　特征线方法（Method of Characteristics，MOC）因其具备强大的几何处理能力，且在计算过程中亦能兼顾计算成本和计算精度，被广泛应用于高保真数值模拟计算中。常见的输运计算方法除 MOC 外，还包括碰撞概率法（Collision Probability Method，CP）和界面流法（Interface Current Method，IC）等。本文从方法理论以及数值计算上将 MOC、CP 和 IC 进行比较分析，对于评估其在 pin-by-pin 计算中的能力尤为重要。同时在 MOC 计算中，不同的参数选择会对计算成本和计算精度产生影响，因此有必要进行敏感性分析以寻求最佳参数。本文首先将三种计算方法从原理上进行比较分析，再基于 2D C5G7-MOX 基准题完成了数值计算及 MOC 参数敏感性初步分析。计算结果表明：MOC 在计算精度、计算效率和内存开销上均优于 CP 和 IC。MOC 的计算耗时和内存开销分别为 23.9min 和 37.5MB，与参考解的相对误差仅为 6.04×10^{-4}。而 CP 和 IC 的计算耗时分别为 MOC 的 56.7 倍和 15.6 倍，内存开销分别为 MOC 的 407.7 倍和 32.8 倍。进一步通过参数敏感性分析发现：网格划分对计算内存开销以及计算时间的影响最大，极角的选择对计算精度的影响最大，并且给出一组建议参数：网格划分 6×6，极角为 GAUS 且数目为 2，方位角个数为 30。该组参数的计算耗时为 45.4min，内存开销为 264.7MB，相对误差为 5.9×10^{-5}，归一化后的栅元均方根误差为 0.00255。

关键词　特征线方法；2D C5G7-MOX；方法比较；敏感性分析；DRAGON

中图分类号　TL99

Comparison of neutron transport calculation methods based on C5G7-MOX and preliminary analysis of sensitivity of MOC parameters

GONG Hanyuan[1]　ZHANG Binhang[2,3*]　ZHANG Yonghong[3]　TANG Haibo[3]　YUAN Xianbao[3]

1(*College of Mechanical and Power Engineering,China There Gorges University,Yichang 443002,China*)

2(*Key Laboratory of Advanced Nuclear Energy Design and Safety, Ministry of Education*, *hengyang 421200,China*)

3(*College of Science,China There Gorges University,Yichang 443002,China*)

Abstract　[Background]: Method of Characteristics (MOC) is widely used in high-fidelity numerical simulation because of its powerful geometric processing ability and its ability to take into account calculation cost and accuracy. In addition to MOC, the common transport calculation methods also include Collision Probability Method (CP) and

---

基金资助：国家自然科学基金(No. 12275153 12175116 12305187), 先进核能技术设计与安全教育部重点实验室基金(KLANEDS202307)

第一作者：龚瀚源，男，2000 年出生，2021 年毕业于三峡大学，现为硕士研究生（2021 年于三峡大学获学士学位），研究领域：反应堆物理

通信作者：张彬航，E-mail：evanustc@mail.ustc.edu.cn

收稿日期：2023-00-00，修回日期：2023-00-00

Supported by National Natural Science Foundation of China (No. 12175116 12275153 12305187), Foundation of Key Laboratory of Advanced Nuclear Energy Design and Safety, Ministry of Education (KLANEDS202307)

First author: GONG Han Yuan, male, born in 2000, graduated from Three Gorges University in 2021, master student,(graduated from Three Gorges University with a bachelor's degree in 2021) focusing on reactor physics

Corresponding author: ZHANG Binhang, E-mail: evanustc@mail.ustc.edu.cn

Interface Current Method (IC). **[Purpose]:** In this paper, the comparative analysis of MOC, CP and IC from method theory and numerical calculation is particularly important for evaluating their ability in pin-by-pin calculation. At the same time, in MOC calculation, different parameter selection will affect the calculation cost and calculation accuracy, so it is necessary to carry out sensitivity analysis to find the best parameter. **[Methods]:** In this paper, the three calculation methods are compared from the principle, and then the numerical calculation and the preliminary analysis of the sensitivity of MOC parameters are completed based on the 2D C5G7-MOX reference problem. **[Results]:** The calculation time and memory cost of MOC are 23.9min and 37.5MB respectively, and the relative error between MOC and reference solution is only 6.04×10^{-4}. The computing time of CP and IC is 56.7 times and 15.6 times that of MOC, and the memory cost is 407.7 times and 32.8 times that of MOC, respectively. Based on the sensitivity analysis of MOC parameters, a set of suggested parameters are given: grid division is 6×6, pole Angle is GAUS and number is 2, and azimuth Angle is 30. The calculation time of this set of parameters is 45.4min, the memory cost is 264.7MB, the relative error is 5.9×10^{-5}, and the normalized RMS error is 0.00255. **[Conclusions]:** The results show that MOC is superior to CP and IC in accuracy, efficiency and memory cost. Through the parameter sensitivity analysis, it is found that the grid division has the greatest influence on the calculation memory cost and calculation time, and the choice of polar Angle has the greatest influence on the calculation accuracy.

Key words Method of Characteristics, 2D C5G7-MOX, comparison of methods, sensitivity analysis, DRAGON

随着新型反应堆的发展，更多非均匀性强、能谱异构更加复杂的堆型出现，为堆芯物理计算与分析带来了挑战。在高保真反应堆物理计算中，常用的中子输运方程求解方法包括：特征线方法（Method of Characteristics，MOC）、碰撞概率法（Collision Probability Method，CP）和界面流法（Interface Current Method，IC）等。CP 和 IC 方法都属于积分输运方法，该方法最早由 A.Amouyal、P.Benoist 和 J.Horowitz 应用于计算栅元的热中子利用系数[1,2]，并且得到了很高的计算精度。因此积分输运方法曾在相当一段时间内被作为反应堆物理计算中的一种重要方法，特别是在轻水堆的栅元能谱计算以及燃料组件能谱计算中被广泛应用[3]。当下积分输运方法作为中子输运求解模块已在多个程序中得以实现，其中包括 APOLLO2[4]、WIMSD-5B[5]、MOSRA[6]等。

特征线方法最早由英国学者 Askew[7]应用于求解复杂的输运计算，随着近些年来计算机性能的不断攀升，特征线方法凭借其精确的数值计算和灵活的几何特性，在高保真反应堆物理分析中得到了广泛的应用[8]。目前国内外许多程序都采用特征线方法作为输运求解器，包括 DRAGON[9,10]、CASMO[11,12]、WIMS[13]等。特征线方法（Method of Characteristics，MOC）是沿中子轨迹以特征线形式求解中子输运方程的一种方法[14]，该方法巧妙地运用了数学技巧，将中子输运方程用微分形式表示，沿着中子运行的轨迹进行积分求解[15]。特征线方法具备强大的几何处理能力，能将角度变量和空间变量同时进行处理，理论上能处理任意几何，并且由于特征线中线与线之间的独立性，使得特征线方法具备天然的并行能力，在计算过程中亦能兼顾计算效率和计算精度。MOC、CP、IC 三种方法各具特点，但在进行高保真计算时，都会面临计算成本的挑战，因此有必要对以上三种输运计算方法进行分析比较，评估其在 pin-by-pin 计算中的能力。

本文首先比较了特征线方法（Method of Characteristics，MOC）、碰撞概率法（Collision Probability Method，CP）和界面流法（Interface Current Method，IC）的计算原理，并基于 2D C5G7-MOX 基准题分析了三种方法的计算精度、计算效率和内存开销。同时由于特征线方法本身在计算的过程中，不同参数的组合会导致计算精度、计算效率和内存开销发生变化，需要进一步开展 MOC 参数敏感性分析。其中 Mira[16]等人基于极角、方位角以及网格划分开展了参数敏感性分析，但仅研究了上述三个参数对计算精度的影响。本文完善了参数敏感性分析中的参数类型，对部分参数的选取范围进行了深入探究，分析比较了各种参数的计算耗时、计算精度和内存开销，能够较为全面的为特征线方法在计算 2D C5G7-MOX 这类强非均匀性组件问题的参数选择与优化提供一定参考。

1 计算方法

1.1 特征线方法

特征线方法（Method of Characteristics，MOC）的核心思想是沿着特征线方向进行积分，将中子输运方程转化成特征线方程，再通过对每一条平行特征线进行输运求解，从而完成对整个目标区域的计算。从理论上讲，特征线方法具有优异的几何适应能力，只要特征线足够密，便可对任意形状的几何区域进行输运求解。

使用特征线方法进行中子输运方程求解时，需将待求解问题的几何区域划分成众多平源区，并假设在所划分的平源区中，宏观截面和中子源项均为常数。如图 1 所示，对于任意平源区 i，其中带箭头的平行实线分别为穿过该区域的特征线，两虚线之间的距离为第 k 条特征线的宽度记作$\delta A_{m,n,k}$，特征线沿着方位角为 m、极角为 n，其中截面和源项近似分别如式（1）和式（2）所示。

$$\sum\nolimits_{t,i}(s) \approx \sum\nolimits_{t,i} \tag{1}$$

$$Q_{i,m}(s) \approx Q_{i,m} \tag{2}$$

式（1）中：$\sum_{t,i}$为平源区内不随位置发生变化的宏观截面，式（2）中：$Q_{i,m}$为平源区内不随位置而发生变化的源项，于是稳态多群中子输运方程可以表示为[1]：

$$sin\theta_n \frac{d}{ds}\phi_{i,m,n,k}(s_{i,m,n,k}) + \sum\nolimits_{t,i}\phi_{i,m,n,k}(s_{i,m,n,k}) = Q_{i,m} \tag{3}$$

式（3）中：θ_n为中子沿着$\Omega_{m,\theta}$方向飞行的极角；$s_{i,m,n,k}$为特征线在 x-y 平面投影所得的长度；$\phi_{i,m,n,k}(s)$为中子角通量。式（3）为一阶线性微分方程，可以解析求解得到下式：

$$\phi_{i,m,n,k}^{\text{out}} = \phi_{i,m,n,k}^{\text{in}}\exp(-\sum\nolimits_{t,i}s_{i,m,n,k}) + \frac{Q_{i,m}}{\sum_{t,i}}[1-\exp(-\sum\nolimits_{t,i}s_{i,m,n,k})] \tag{4}$$

式（4）中：$\phi_{i,m,n,k}^{\text{out}}$为出口处的中子角通量密度，$\phi_{i,m,n,k}^{\text{in}}$为入口处的中子角通量密度。对式（2）沿着特征线段进行积分，由中子守恒关系可得：

$$\bar{\phi}_{i,m,n,k}\cdot s_{i,m,n,k} = \int_0^{s_{i,m,n,k}}\phi_{i,m,n,k}^{\text{in}}\exp(-\sum\nolimits_{t,i}s_{i,m,n,k}) + \frac{Q_{i,m}}{\sum_{t,i}}[1-\exp(-\sum\nolimits_{t,i}s_{i,m,n,k})]ds \tag{5}$$

式（5）中：$\bar{\phi}_{i,m,n,k}$为沿特征线 k 的平均角通量密度，将式（5）化简得下式：

$$\bar{\phi}_{i,m,n,k} = \frac{Q_{i,m}}{\sum_{t,i}} + \frac{\phi_{i,m,n,k}^{\text{in}} - \phi_{i,m,n,k}^{\text{out}}}{\sum_{t,i}s_{i,m,n,k}} \tag{6}$$

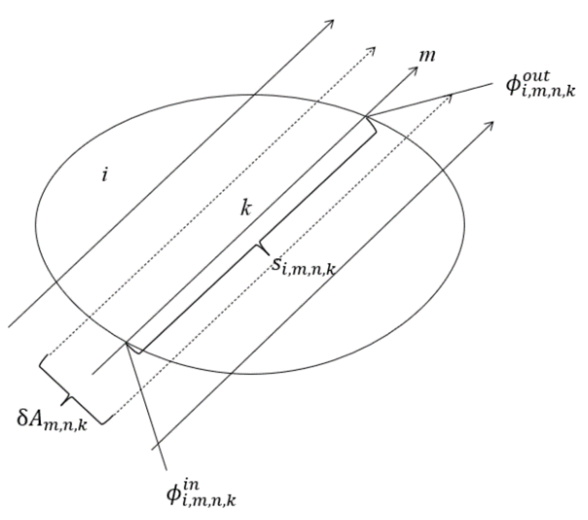


图 1　特征线方法示意图

Fig.1　Diagram of method of characteristics

对在区域 i 内的以方位角 m、极角 n 的所有特征线段，以体积为权重进行求和，得其到区域 i 内的平均

角通量密度：

$$\bar{\phi}_{i,m,n}=\frac{\sum_k \bar{\phi}_{i,m,n,k} s_{i,m,n,k} \delta A_{m,n,k}}{V_i} \tag{7}$$

式（7）中：$\bar{\phi}_{i,m,n}$是以 m 方位角、n 极角穿过 i 区域的所有特征线段的平均角通量密度，V_i表示区域的体积大小，对其方位角和极角进行加权平均，可得 i 区域内的中子通量为：

$$\phi_i=\sum_{m=1}^{M}\omega_m\sum_{n=1}^{N}\omega_n\,\bar{\phi}_{i,m,n} \tag{8}$$

式（8）中：ω_m表示方位角求积系数，M 为方位角的离散数目，ω_n为极角求积系数，N 为极角的离散数目，将式（7）和式（6）代入式（8）中可得，i 区域内的标量中子通量密度如下：

$$\phi_i=\frac{4\pi Q_i}{\Sigma_{t,i}}+\frac{\sum_{m=1}^{M}\omega_m\sum_{n=1}^{N}\omega_n[\sum_k(\phi_{i,m,n,k}^{\mathrm{in}}-\phi_{i,m,n,k}^{\mathrm{out}})]\delta A_{m,n,k}}{\sum_k V_i} \tag{9}$$

根据式（9）可知，在计算各平源区的中子通量密度时，极角 n、方位角 m、特征线密度（特征线宽度 $\delta A_{m,n,k}$）以及各平源区域划分的精细程度都会直接影响中子通量的计算精度。因此，本文基于上述参数开展敏感性分析，比较不同参数组合对计算精度、计算时间和内存开销的影响程度，为后续特征线参数的选择和优化提供参考。

1.2 碰撞概率法

碰撞概率法（Collision Probability Method，CP）是求解积分中子输运方程的最基本方法，运用碰撞概率法进行求解时，将系统划分成 N 个互不相交的均匀子区，V_i=1,2,······N，其中当 $i\neq j$ 时，$V_i\cap V_j$=0。由于 V_i 划分的足够小，可以近似地认为在每一子区域内的截面参数等于常数。P_{ij} 为 j 区内产生的一个各向同性中子，不经任何碰撞到达 i 区发生首次碰撞的概率[17]，由于 P_{ij} 的求解与 j 区的源中子或中子通量密度的分布有关，而中子通量密度正是所要求的未知量。因此需要引入平源近似，即当子区域划分得较小时，近似地认为每个区域的源中子或中子通量密度的分布等于常数，同时为了简化计算，亦要假设入射中子在子区表面上的空间分布是均匀的，且入射中子的角分布各向同性[18]。故在多群近似的条件下，便可对$P_{ij,g}$以及通量进行求解如下：

$$P_{ij,g}=\frac{\Sigma_{t,i,g}}{V_j}\int_{V_i}\mathrm{d}V\int_{V_j}\frac{\exp\left[-\tau_g\left(r'-r\right)\right]}{4\pi|r'-r|^2}\mathrm{d}V' \tag{10}$$

$$\Sigma_{t,i,g}\phi_{i,g}V_i=\sum_{j=1}^{I}\left[\sum_{g'=1}^{G}\Sigma_{j,g'-g}\phi_{j,g'}+S_{j,g}\right]P_{ij,g}V_j\quad,\ g=1,2,\cdots,G \tag{11}$$

式（10）中：$P_{ij,g}$为 g 群内在 j 区内产生的各向同性的中子，不经任何碰撞到达 i 区发生首次碰撞的概率。$\Sigma_{t,i,g}$为 g 群中子截面近似得到的宏观截面，$r'-r$为空间上位置的变化，$\tau_g\left(r'-r\right)$为从r'到r点之间的自由程，V_j为区域 j 的体积。式（11）称为碰撞概率形式的中子积分输运方程，其中等号右端方括号内项表示在V_j内单位体积内 g 群的源中子数，因此，等号右端整体便表示所有 j 区的 g 群中子在V_i区域内首次发生碰撞的数目，等于等号左端V_i内的碰撞数$\Sigma_{t,i,g}\phi_{i,g}V_i$。且在整个碰撞概率法求解的过程中，中子飞行首次碰撞概率矩阵 P 的求解最为复杂和耗时[3]。

1.3 界面流法

界面流法（Interface Current Method，IC）的基本思想是：将系统分为若干子区，对每个子区进行均匀化处理后，再对每个子区建立中子输运方程，各子区之间通过界面上的中子流连续的条件进行耦合，以此来求解中子通量。

将系统划分为 $NI*NJ$ 个子区，假定中子源的角分布为各向同性，空间分布采用线性分布，即所谓的线性源近似，于是中子源项可表示为[17]：

$$Q(x,y,\Omega)=\frac{1}{4\pi}\bar{Q}\left[1+a_x\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)+a_y\left(\frac{y}{b}-\frac{1}{2}\right)\right],0\leqslant x\leqslant a,0\leqslant y\leqslant b \tag{12}$$

式（12）中：$Q(x,y,\Omega)$为子区内点(x,y)处沿Ω方向的中子源密度，$\bar{Q}$为子区的平源强，a、b为子区在 x、y 方向的边长，a_x、a_y为源项在 x、y 方向上的线性分布系数。

如图 2 的矩形几何为例，对于子区（i，j）设体积为V_{ij}，根据中子平衡可得在界面流方程为：

$$\sum_{k=A,B,C,D} \frac{1}{V_{ij}}\left(\sum_{q=1}^{2} J_{k,q}^{+} - \sum_{q=3}^{4} J_{k,q}^{-}\right) + \Sigma_{t,ij}\bar{\phi}_{ij} = Q_{ij} \tag{13}$$

式（13）中：$\bar{\phi}_{i,j}$为子区（i，j）的平均通量，$\Sigma_{t,ij}$为子区（i，j）的总截面，Q_{ij}为子区（i，j）内的平均源强（包括散射源、裂变源、外中子源）。k 为矩形几何子区的四个界面（A，B，C，D）如图 2 所示，q 为各界面上中子飞行方向划分为四个象限，每个边界的四个象限在图 2 中均已标出，$J_{k,q}^{+}$为子区界面 k 象限 q 的出射中子流，$J_{k,q}^{-}$为子区界面 k 象限 q 的入射中子流。

界面流法在求解通量时，考虑的是每个子区域内源与相邻子区域的边界的中子守恒关系[27]，每个子区只需计算首次穿透和泄露两个概率，且计算的概率数目只与系统内所出现的子区类型成正比。而碰撞概率法中首次碰撞的计算量，却是与系统内子区数目的平方成正比。因此界面流法相较于碰撞概率法，具有较高的计算效率。

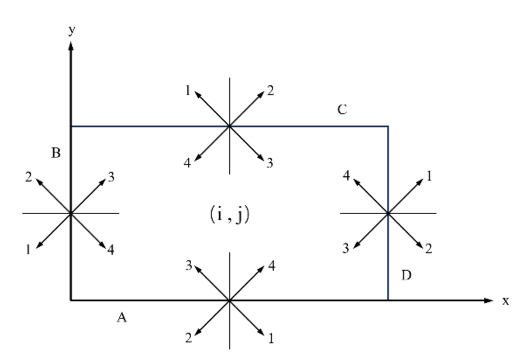


图 2　象限的划分与界面标号

Fig.2　Quadrant division and interface labeling

2 计算模型

2.1 2D C5G7 MOX 基准题

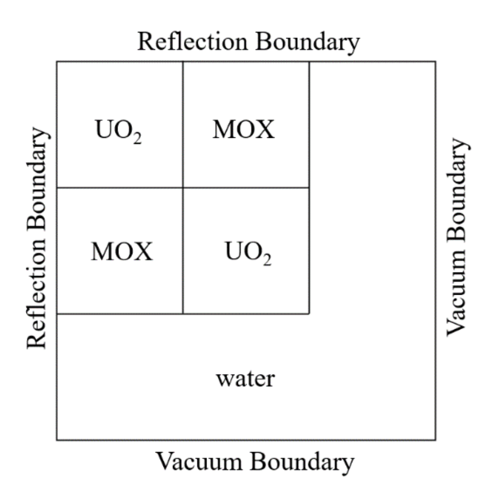


图 3　C5G7-MOX 组件布置示意图

Fig.3　C5G7-MOX assembly layout diagram

C5G7 基准题是由 OECD/NEA 于 2003 年发布的基准题，主要用于评价现有输运计算方法进行全堆芯非均匀计算的能力[19]。该基准题包含了 UO_2 和 MOX 两种燃料组件，每个组件的边长为 21.42cm，由 17×17 的燃料栅元组成。外围慢化剂区域的宽度与组件边长相同。2D C5G7-MOX 基准题的结构如图 3 所示，右侧和下方为真空边界，左侧和上方为全反射边界[16]。各类组件中的各个栅元都具有相同的几何参数。栅元

几何结构如图 4 所示，其中包括燃料和包壳打混的圆形区域以及外部慢化剂的矩形区域，栅元边长为 1.26cm，燃料区域的半径为 0.54cm。

C5G7-MOX 基准题共由七种材料构成：UO_2 燃料、4.3%、7.0%和 8.7%的 MOX 燃料、裂变室、导向管和水。其中水不仅仅用于填充外部慢化剂区域，还用于填充每个栅元内部棒外的区域，UO_2 和 MOX 组件内的燃料棒布置如图 5 所示。

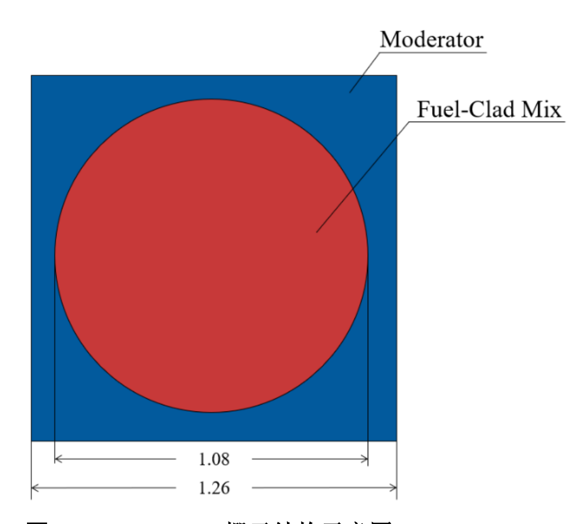


图 4 C5G7-MOX 栅元结构示意图

Fig.4 C5G7-MOX cell structure diagram

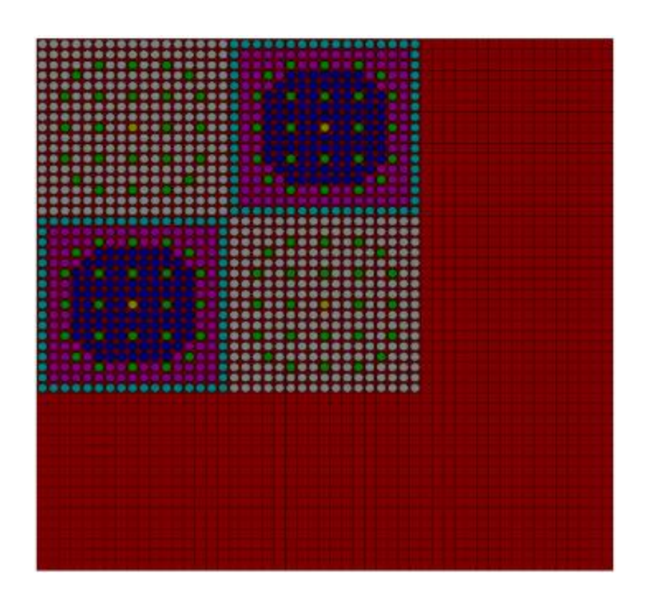


图 5 C5G7-MOX 燃料棒布置示意图

Fig.5 C5G7-MOX fuel rod layout diagram

2.2 DRAGON5.0.8

DRAGON 是由加拿大蒙特利尔理工大学核工程研究所开发的，基于确定论方法的反应堆栅格计算程序[4]。该程序采用特征线方法、界面流法、碰撞概率法等多种数值方法求解中子输运方程[20]，已被广泛用于反应堆物理计算研究中。DRAGON 具有较强的几何处理能力，能处理常见的二维和三维几何模型。基于 DRAGON 计算 2D C5G7-MOX 基准题的方法如图 6 所示。首先通过 MAC 模块读入该基准题中各材料的 7 群截面参数，几何上采用 51×51 的栅元阵列排布，其中顶部和左侧的边界条件为镜面边界，右侧和底部的边界条件为真空边界（GEO 模块），然后对待求解的几何区域进行特征线布置与追踪，获得各平源区内特

征线的相关几何信息（NXT 模块和 MCCGT 模块），最后逐一对每条特征线进行输运求解，获得各平源区内的中子通量密度及反应率，完成二维输运计算（ASM 模块、FLU 模块和 EDI 模块）。

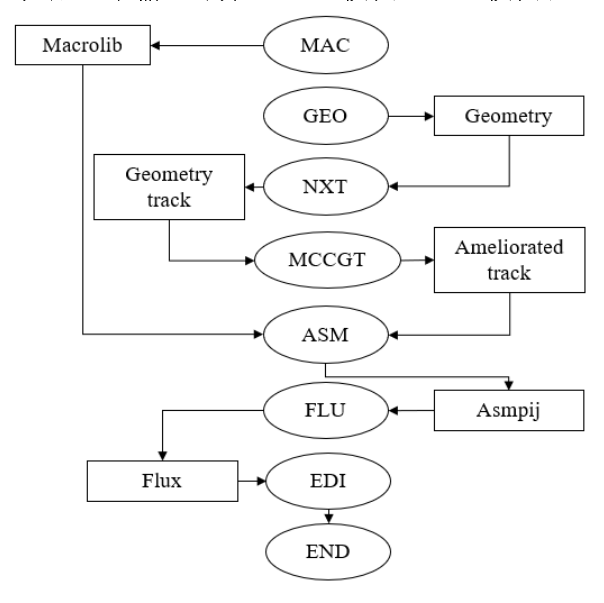


图 6　基于 DRAGON 的特征线方法

Fig.6　Method of characteristics based on DRAGON

3 计算结果及分析

本文采用蒙特卡罗程序 OpenMC 的计算结果作为参考解。OpenMC 是 2011 年由美国麻省理工学院开发的蒙特卡罗中子和光子输运模拟程序，专注于反应堆建模和反应堆物理方法研究，旨在实现高保真、高性能、大规模仿真计算[21,22]，具备临界计算、固定源计算等多种功能[23]。

测试环境为 PC 单机，具备 5.0GHz 十四核心 Intel 酷睿 i9 处理器，16GB 内存。通过 OpenMC 共计算模拟 800 代，去掉前 200 代，统计后 600 代，每代跟踪 600000 个中子，以得到各燃料栅元的归一化功率及有效中子增殖因子(k_{eff}＝1.18652±0.00004)。相对误差计算公式如下：

$$\mathrm{RE}=\frac{\left|k_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{D}}-k_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{O}}\right|}{k_{\mathrm{eff}}^{d}} \tag{14}$$

式（14）中：$k_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{D}}$为本文计算的有效中子增殖因子，而$k_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{O}}$为 OpenMC 计算的有效中子增殖因子。通过比较组件中每个栅元的功率计算误差，从而进一步对功率的空间分布进行评估，均方根误差计算公式如下：

$$\mathrm{RMSE}=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N}\left(p_{\mathrm{D},i}-p_{\mathrm{O},i}\right)^{2}}{N}} \tag{15}$$

式（15）中：N 为栅元的总数目，$p_{\mathrm{D},i}$为本文计算所得第 i 个栅元的归一化功率，$p_{\mathrm{O},i}$为参考解中第 i 个栅元的归一化功率。

3.1 不同中子输运方法计算比较

首先将特征线方法（MOC）与碰撞概率法（CP）、界面流法（IC），通过对 2D C5G7-MOX 基准题计算的计算精度、计算效率和内存开销进行比较。再从三种方法的计算原理进行解释，能够更全面地对特征线方法、碰撞概率法、界面流法的计算能力进行评估。

表 1 展示了分别采用特征线方法、碰撞概率法和界面流法在计算 2D C5G7-MOX 基准题的耗时、内存开销以及相对误差。计算时间方面：特征线方法耗时最短，界面流法次之，碰撞概率法最长。其中界面流法耗时是特征线方法的 15.6 倍，碰撞概率法耗时是特征线方法的 56.7 倍；内存开销方面：特征线方法的内存开销远小于碰撞概率法和界面流法，其中碰撞概率法内存开销最大。界面流法的内存开销是特征线方法

的 32.8 倍，碰撞概率法的内存开销是特征线方法的 407.7 倍；计算精度方面：特征线方法的计算结果最为精确，与参考解的相对误差只有 6.04×10^{-4}，碰撞概率法算得的结果与参考解相对误差 6.14×10^{-4}，而界面流法与参考解相对误差高达 3.8996×10^{-2}。

采用碰撞概率法计算虽然也足够精确但是会消耗大量时间以及内存，原因在于碰撞概率法将系统分成若干区域，每个区域的中子通量密度彼此相互耦合，得到中子通量需要求解所有区域的首次碰撞概率[24]。这些都会使计算规模变大，从而导致耗时增多内存开销增大。界面流法在计算过程中，由于中子流过各子区域之间的界面必须在连续条件下耦合，且每个子区域只与相邻子区域耦合，因此在平源近似假设下计算强非均匀性问题的误差较大[25,26]，会使其误差远大于特征线方法和碰撞概率法。特征线方法在计算过程中，只需要足够密的特征线将所有计算区域进行覆盖，沿着特征线进行积分，从而完成对整个区域的计算。因此可以通过调整特征线的疏密程度，在保证精度的同时也能减小计算成本。综合以上分析，特征线方法在计算 2D C5G7-MOX 基准题这类强非均匀性的问题时，计算精度、计算效率和内存开销总体上是优于碰撞概率法和界面流法。

表 1 2D C5G7-MOX 燃料组件计算结果

Table1 2D C5G7-MOX fuel assembly calculation results

计算方法 Computing method	耗时 Elapsed time / min	内存开销 Memory overhead / MB	相对误差 Relative error / 10^{-5}
MOC	23.9	37.5	60.4
CP	1355.6	15291.1	61.4
IC	374.1	1233.4	3899.6

3.2MOC 参数敏感性分析

进一步对影响特征线方法计算结果的关键参数进行敏感性分析。由式（9）可知极角、方位角、特征线密度的选择都会对中子通量的计算结果产生影响，且每个栅元划分的网格数目也会对计算精度、计算效率和内存开销产生影响。

通过改变网格数目、方位角、极角、特征线密度进行计算，共得到 44 组数据，初步分析得出，以上参数对计算效率以及精度的影响从大到小为：网格数目、极角、方位角、特征线密度。因此，本文按照对计算产生的影响大小顺序，分别对网格数目、极角、方位角、特征线密度进行计算分析，参数类型及区间如表 2 所示：

表 2 参数类型与选择区间

Table2 Parameter type and selection interval

参数类型 Parameter type	选择区间 Selection interval
极角类型 Polar Angle type	GAUS、LCMD、CACB
极角数目 Number of polar angles	2、3
方位角 Azimuth angles	8、12、16、30、32、64
线密度 linear density / cm^{-1}	8、10、12、15、20

网格划分 Mesh generation	2×2、4×4、6×6、8×8

3.2.1 网格划分与极角

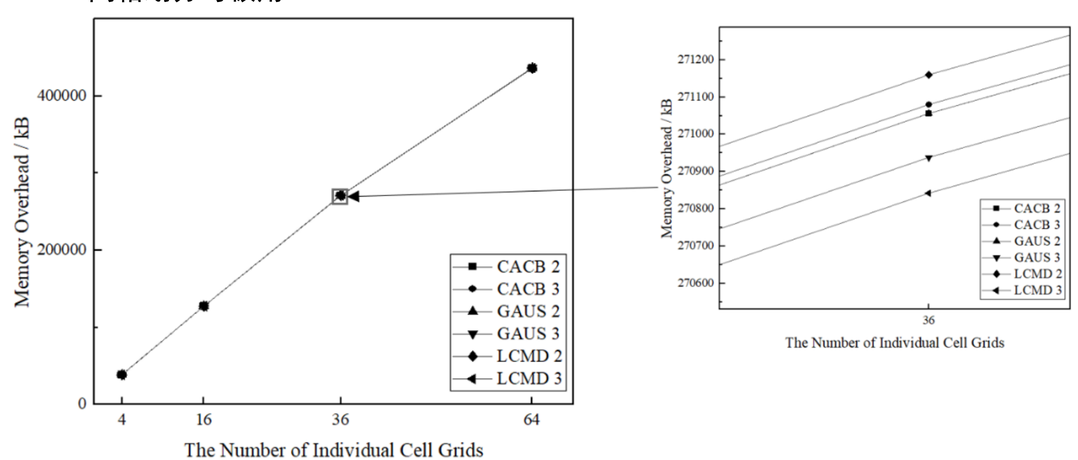


图 7　不同网格和极角下的内存开销

Fig.7　Memory overhead for different grids and polar angles

图 7 展示了选择不同的网格划分以及不同极角进行计算所得的内存开销，其中横坐标表示单个栅元网格数目，纵坐标表示整个计算过程得内存开销（单位 kB），其中不同的曲线分别代表六种极角。从图 7 可知，随着单个栅元的网格划分数目的增多，内存开销也随之显著增大。而相比之网格划分对内存开销的影响，不同极角的选择对内存开销的影响几乎可以忽略不计。在网格划分为 2×2 的情况下，六种极角分别计算的内存开销为 3.8×10^4kB；在网格划分为 4×4 的情况下，六种极角分别计算的内存开销为 1.27×10^5kB；在网格划分为 6×6 的情况下，六种极角分别计算的内存开销为 2.71×10^5kB；在网格划分为 8×8 的情况下，六种极角分别计算的内存开销为 4.36×10^5kB。根据不同网格划分和极角下的内存开销可得，相同网格数目下的不同极角划分对内存的开销影响仅在 400kB 以内，而不同网格划分对内存开销影响非常明显，网格划分越密内存开销便越大，8×8 网格划分比 2×2 网格划分内存开销多 3.98×10^5kB，是 2×2 网格划分的 11.4 倍。

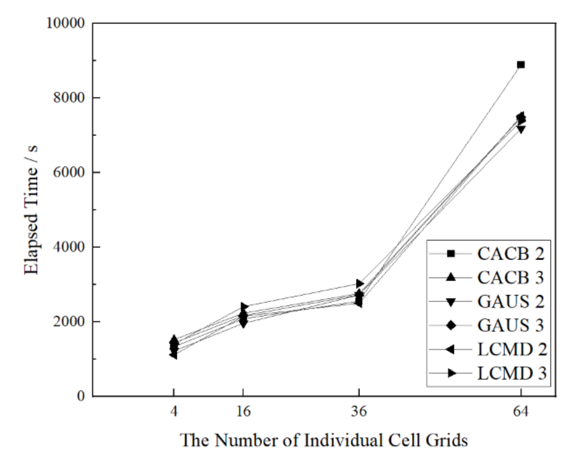


图 8　不同网格和极角下的总耗时

Fig.8　Total time spent at different grids and polar angles

图 8 展示了不同网格和极角下的耗时，其中横坐标表示单个栅元网格数目，纵坐标表示整个计算过程的耗时（单位 s），其中不同的线分别代表六种极角。从图 8 可知，网格划分对耗时的影响要大于极角选择，且随着网格划分数目越多，计算所需的耗时明显增多。在网格划分为 2×2 的情况下，六种极角分别计算的平均耗时为 1.3×10^3s；当网格划分增加到 4×4 时，六种极角分别计算的平均耗时也随之增加到 2.2×10^3s；在 6×6 的更多网格划分情况下，六种极角分别计算的平均耗时也上升到了 2.7×10^3s；直至网格划分增加到 8×8 时，六种极角分别计算的平均耗时为 7.4×10^3s。图 8 中可知，网格数目从 6×6 增加到 8×8 时，耗时的变化尤为突出，六种不同的极角的耗时都会增加至少 4.6×10^3s。

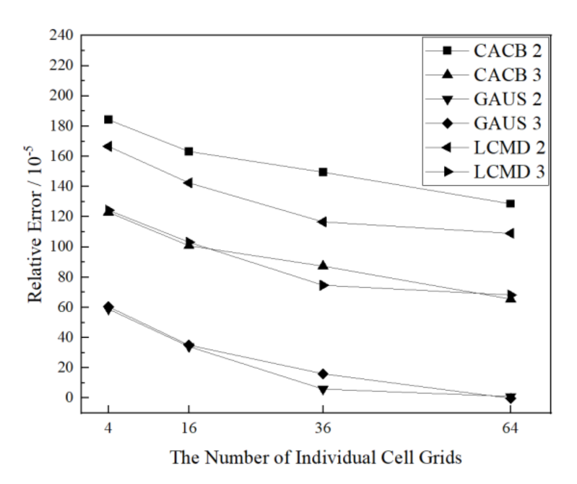


图 9 不同网格和极角下的计算误差

Fig.9 Calculation error under different grids and polar angles

图 9 展示了不同极角在不同网格数目下计算所得的误差。不论选择何种极角类型和个数，随着网格划分越密，计算精度都有显著增长。其中 GAUS 求积组要比其他求积组精确至少 5×10^{-4}，在 GAUS 求积组中选择极角数目 2 比 3 更加精确。在网格划分分别为 6×6 与 8×8 时，选择 GAUS(2)极角的计算精度仅在 5×10^{-5} 内发生变化。但由图 6 和图 7 可知，此时网格划分 8×8 的内存开销是网格划分 6×6 的 1.6 倍，而耗时更是网格划分 6×6 的 2.7 倍。根据不同网格划分和极角选择下对计算精度、计算效率和内存开销的分析，得出网格划分 6×6，极角选择 GAUS(2)，能较好的兼顾计算精度和效率。

3.2.2 方位角

在基于网格划分 6×6，极角选择 GAUS(2)的参数条件下，通过不同的方位角个数完成进一步的敏感性分析。不同方位角下的内存开销、耗时以及计算误差如表 3 所示。从耗时可得出，随着方位角数目的增多，耗时有明显的增长，但到了方位角为 30 之后耗时几乎不再增长，且方位角数目为 30 时耗时约为方位角数目为 8 的 3 倍。在内存开销中可得出，改变方位角的数目内存开销的变化在 5%以内。根据表 3 中的计算误差可知，随着方位角数目的增多，计算精度也会愈发精确，但在方位角数目为 30 之后，精度便不再发生变化。这是由于 DRAGON 5.0.8 程序中方位角选择的上限为 30，故综合考虑方位角的最优参数为 30。

表 3 不同方位角下的计算结果

Table3 Calculation results under different azimuth angles

方位角 Azimuth angles	耗时 Elapsed time / s	内存开销 Memory overhead / kB	相对误差 Relative error / 10^{-5}
8	890.06	268492	51.16
12	1345.66	271336	21.83
16	1729.97	281766	13.23

30	2671.79	271202	5.90
32	2723.28	271056	5.90
64	2537.84	271412	5.90

3.2.3 特征线密度

以网格划分 6×6，极角选择 GAUS(2)，方位角为 30 的情况下，选择不同的特征线密度进行计算，得到内存开销、耗时及计算误差如表 4 所示。不同特征线密度下的计算精度都吻合较好，皆在 3×10^{-4} 以内。其中线密度为 12（cm^{-1}）的精度最好，误差仅为 5.9×10^{-5}。同时由于 DRAGON 程序采用了特征线段合并技术，因此随着特征线密度的增加，内存不会出现明显的增加[28]。虽然合并了部分特征线段，但仍会使得整体过程规模增大，从而导致耗时增加。因此，特征线密度选择 12（cm^{-1}）能使计算误差最小，同时兼顾内存开销和计算时间。

表 4　不同特征线密度下的计算结果

Table4　Calculation results are obtained under different characteristic linear densities

特征线密度 Characteristic linear densities / cm^{-1}	耗时 Elapsed time / s	内存占用 Memory overhead / kB	相对误差 Relative error / 10^{-5}
8	1807.41	271382	14.16
10	2409.81	272808	10.87
12	2662.86	271268	5.90
15	2856.16	273492	22.50
20	3487.05	282894	12.30

3.2.4 功率分布

基于 OpenMC 得到的归一化功率分布如图 10 所示。同时以网格划分 6×6、极角 GAUS(2)、方位角 30、特征线密度 12（cm^{-1}）作为选定参数，计算所得的功率归一化分布如图 11 所示。由图 11 可知，计算结果与参考解吻合较好，其中最大归一化功率为 2.506，位于左上角 UO_2 燃料组件中的第 4 行 5 列和第 5 行 4 列，与参考解的相对误差为 0.04%。位于左下角 UO_2 燃料组件的裂变室第 26 行 26 列的归一化功率最小，其值为 1.61×10^{-5}，与参考解的的相对误差为 0.32%。通过式（15）计算得到整个基准题的均方根误差为 0.00255，由此可知，该参数的计算结果与参考解吻合良好。

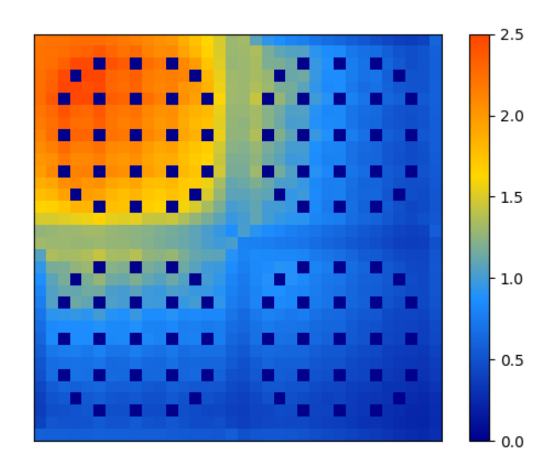


图 10 OpenMC 栅元归一化分布

Fig.10 Normalized cell distribution in OpenMC

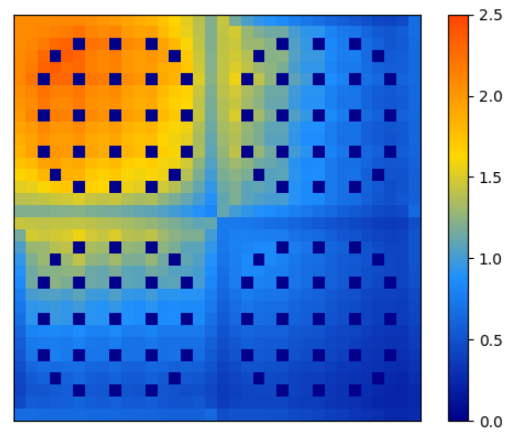


图 11 DRAGON 栅元归一化分布

Fig.11 Normalized cell distribution in DRAGON

通过改变不同参数进行敏感性分析可得，在计算精度上：影响最大的因素是极角的选择，其中 GAUS 求积组要比其他求积组精确至少 5×10^{-4}，由公式（8）可知，因为不同求积组会使得角度离散过程中的极角求积系数ω_n发生变化，进而影响最终的计算结果[29]。在计算成本上：网格划分对计算内存开销以及计算时间的影响最大，原因在于增多单个栅元的网格数目，会使整个 51×51 的组件中每个栅元的网格划分都增多，从而显著增加其计算规模，最终影响到计算所需的总时间以及内存开销。

4 结语

本文在分析比较 MOC、CP 和 IC 计算原理的基础上，进一步基于 2D C5G7-MOX 基准题进行了数值计算分析，计算结果表明：特征线方法在计算精度、计算效率和内存开销方面均优于碰撞概率法和界面流法。其中特征线方法的耗时为 23.9min，只占界面流法的 1/16。特征线方法内存开销约 37.5MB，仅为界面流法的 1/33。而碰撞概率法的耗时、内存开销则远大于以上两种方法，但特征线方法和碰撞概率法的与基准值的相对误差都约为 6.1×10^{-4}，远小于界面流法的相对误差。因此，MOC 在计算 2D C5G7-MOX 这类强非均匀性组件问题时，其计算精度、计算效率和内存开销总体优于碰撞概率法和界面流法。

进一步对特征线方法进行初步参数敏感性分析，选择网格划分、方位角、极角类型与个数、特征线密度进行计算分析。通过不同参数组合下的计算结果比较了计算精度、计算效率和内存开销。最终得出网格划分 6×6、极角 GAUS(2)、方位角 30、特征线密度 12cm^{-1} 是一组能够较好的兼顾计算精度和计算成本的参数，该参数组合下的计算耗时为 45.4min，内存开销 264.7MB，相对误差为 5.9×10^{-5}，归一化后的栅元均方

根误差为 0.00255，与参考解吻合良好。由于参数的选择与计算精度、计算效率和内存开销间的关系复杂，各自权重难以精确量化评估，后续研究中拟引入深度学习算法对参数选择及优化进行深入研究。

作者贡献声明 龚瀚源负责建立模型，研究并分析数据以及起草论文；张彬航负责设计具体研究内容和方向，提出合理化研究方案以及提供理论支撑，同时指导程序的使用以及数据的采集，对论文的知识性内容做审阅并且负责对论文的修改；袁显宝负责过程监督以及成果验收；张永红负责论文审阅，唐海波负责技术支持。

参考文献

1 谢仲生, 邓力. 中子输运理论数值计算方法[M]. 西安: 西北工业大学出版社, 2005.

XIE Zhongsheng, DENG Li. Numerical calculation method of neutron transport theory[M]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University Press, 2005.[LinkOut]

2 Amouyal A, Benoist P, Horowitz J J. New method for determining the thermal utilization factor in a unit cell[J]. Nuclear. Energy, 1957,6: 79.

3 曹良志. 近代反应堆物理分析[M]. 北京: 中国原子能出版社, 2017: 93.

Cao Liangzhi. Analysis of modern reactor physics [M]. Beijing: China Atomic Energy Press, 2017: 93.

4 M. Coste, H. Tellier, P. Ribon, V. Raepsaet, C. Van der Gucht, New Improvements in the Self-Shielding Formalism of the Apollo-2 Code, Technical Report, CEA Centre d'Etudes de Saclay, 1993.

5 T. Kulikowska, WIMSD-5B: a Neutronic Code for Standard Lattice Physics Analysis, Distributed by NEA Data Bank. Saclay, France, 1996.

6 K. Okumura, T. Kugo, Y. Nakano et al, "Development of Modular Reactor Analysis Code System MOSRA," Preprints L46, 2008 Fall Meeting of the Atomic Energy Society of Japan, (2008) [in Japanese].

7 Askew JR. A characteristics formulation of the neutron transport equation in complicated geometries[J]. AEEW-M, 1972, 1108.

8 梁亮. 基于特征线方法的 2D/1D 及 2D/3D 耦合中子输运计算方法研究[D]. 西安: 西安交通大学, 2017.

LIANG Liang. Research on 2D/1D and 2D/3D Coupled neutron transport calculation methods based on eigenline method[D]. Xi'an: Xi'an Jiaotong University, 2017.

9 Hebert A. DRAGON5 and DONJON5, the contribution of Ecole Polytechnique de Montreal to the SALOME platform[J]. Annals of Nuclear Energy, 2016, 87: 12-20.

10 Le Tellier R, Hebert A. On the integration scheme along a trajectory for the characteristics method[J]. Annals of Nuclear Energy, 2006, 33 (14-15): 1260-1269.

11 Hsiao MY, Wheeler JK, de la Hoz C. Application of CASMO-4/MICROBURN-B2 Methodology to Mixed Cores with Westinghouse Optima2 Fuel[J]. Nuclear Science and Engineering, 2011, 167 (3): 230-241.

12 Rhodes J LD, Smith K CASMO-5/CASMO-5M - A fuel assembly burnup program methodology manual. In: Report SS, editor, 2008.

13 Lindley BA, Hosking JG, Smith PJ, et al. Current status of the reactor physics code WIMS and recent developments[J]. Annals of Nuclear Energy, 2017, 102: 148-157.

14 Askew J R. A characteristics formulation of the neutron transport equation in complicated geometries[R]. United Kingdom Atomic Energy Authority, 1972.

15 刘紫静, 于涛, 谢金森, 等. 基于 DRAGON 程序的多种中子输运计算方法对比分析[J]. 中国科技论文, 2015, 10(23): 2728－2733. DOI: 10.3969/j.issn.2095-2783.2015.23.008.

LIU Zijing, YU Tao, XIE Jinsen, et al. Neutron transport calculation methods comparative analysis based on DRAGON code[J]. China Sciencepaper, 2015, 10(23): 2728–2733. DOI: 10.3969/j.issn.2095-2783.2015.23.008.[知网中文][知网英文]

16 Mira M, El Hajjaji O, Jai O, et al. Derivation of optimal process MOC parameters and analysis of the 2D C5G7 MOX benchmark using DRAGON5 code[J]. Nuclear Engineering and Design, 2022, 388: 111613. DOI: 10.1016/j.nucengdes.2021.111613.[LinkOut]

17 吴宏春. 中子输运方程确定论数值方法[M]. 北京: 中国原子能出版社, 2018: 65.

Wu Hongchun. Numerical method for determining Neutron Transport Equation [M]. Beijing: China Atomic Energy Press, 2018:65.

18 谢仲生. 中子输运理论数值计算方法[M]. 西安: 西安交通大学出版社, 2022: 158.

Xie Zhongsheng. Theoretical Numerical Calculation Method for Neutron Transport [M]. Xi 'an: Xi 'an Jiaotong University Press, 202:158.

19 Marleau G, Hebert A, Roy R. A user guide for DRAGON version 4, Report IGE-294[Z]. Montr′eal: Institut de génie nucléaire, école Polytechnique deMontréal, 2015

20 毕光文, 司胜义. DRAGON 程序用于压水堆燃料组件计算的有效性验证与分析[C]//第十三届反应堆数值计算与粒子输运学术会议暨 2010 年反应堆物理会议论文集. 西安: 第十三届反应堆数值计算与粒子输运学术会议, 2010: 1-8.

BI Guangwen, SI Shengyi. Validation and analysis of calculations for PWR assemblies with lattice code DRAGON[C]//Proceeding

sof13th Reactors and Particle Transport Numerical Conference and Reactor Physics Conference in 2010. Xi’an: 13th Reactors and Particle Transport Numerical Conference and Reactor Physics Conference, 2010: 1-8. (inChinese)

21 郝鹏飞 基于 OpenMC 的空间核反应堆临界及安全分析[D]. 江西: 东华理工大学, 2022.
Hao Pengfei: Criticality and Safety Analysis of Space nuclear reactor based on OpenMC [D]. Jiangxi: East China University of Technology, 2022.

22 Paul K. Romano, et al., OpenMC: a state-of-the-art Monte Carlo code for research and development, Ann. Nucl. Energy 82 (2015) 90–97.

23 沈芷睿,孙启政,何东豪等.基于 BEAVRS 基准题高保真建模的 OpenMC 程序和 NECP-X 程序的对比验证[J].核技术,2022,45(01):73-81.
Shen Zhirui, Sun Qizheng, He Donghao et al. Comparative verification of OpenMC program and NECP-X program based on high fidelity modeling of BEAVRS benchmark problem [J]. Nuclear Technology, 2002,45(01):73-81.

24 吴宏春. 中子输运理论及其数值方法[M]. 西安: 西安交通大学出版社, 2007: 34.
WU Hongchun. Neutron transport theory and numerical methods[M]. Xi’an: Xi’an Jiaotong University Press, 2007: 34.

25 刘萍萍, 吴宏春. 基于三角形网格的穿透概率方法研究[J]. 核动力工程, 2006, 27(5): 12–18, 41. DOI: 10.3969/j.issn.0258-0926.2006.05.003.
LIU Pingping, WU Hongchun. Study of transmission probability method based on triangle meshes[J]. Nuclear Power Engineering, 2006, 27(5): 12–18, 41. DOI: 10.3969/j.issn.0258-0926.2006.05.003.[知网中文][知网英文]

26 刘国明, 吴宏春. 基于三棱柱网格的穿透概率方法研究[J]. 核动力工程, 2008, 29(4): 24–30.
LIU Guoming, WU Hongchun. Transmission probability method based on triangular-z mesh[J]. Nuclear Power Engineering, 2008, 29(4): 24–30.[万方]

27 马逸尘, 高伟, 唐富初, 等. 三维中子积分输运方程的数值解: 中子碰撞概率的计算[J]. 工程数学学报, 1984, 1(1): 119–128.
MA Yichen, GAO Wei, TANG Fuchu, et al. Numerical solution of three-dimension integral transport equation: calculation of neutron collision probabilities[J]. Chinese Journal of Engineering Mathematics, 1984, 1(1): 119–128.[知网中文][知网英文]

28 Technical report : G. Marleau et al. A USER GUIDE FOR DRAGON VERSION5[B]. IGE–335, 2021.

29 Yamamoto A, Tabuchi M, Sugimura N, et al. Derivation of optimum polar angle quadrature set for the method of characteristics based on approximation error for the bickley function[J]. Journal of Nuclear Science and Technology, 2007, 44(2): 129–136. DOI: 10.1080/18811248.2007.9711266.[LinkOut]